

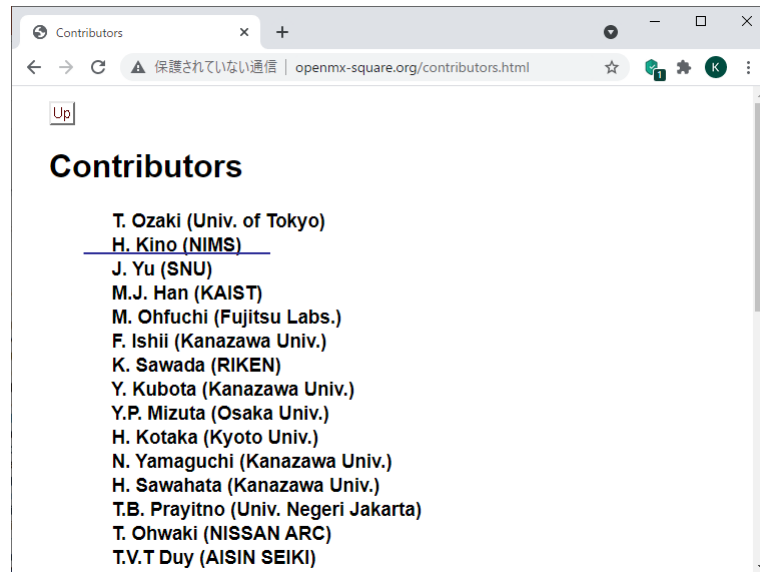
第一原理計算の自動化と網羅計算 を可能にするPythonライブラリ

(国) 物質・材料研究機構
主任研究員 木野日織

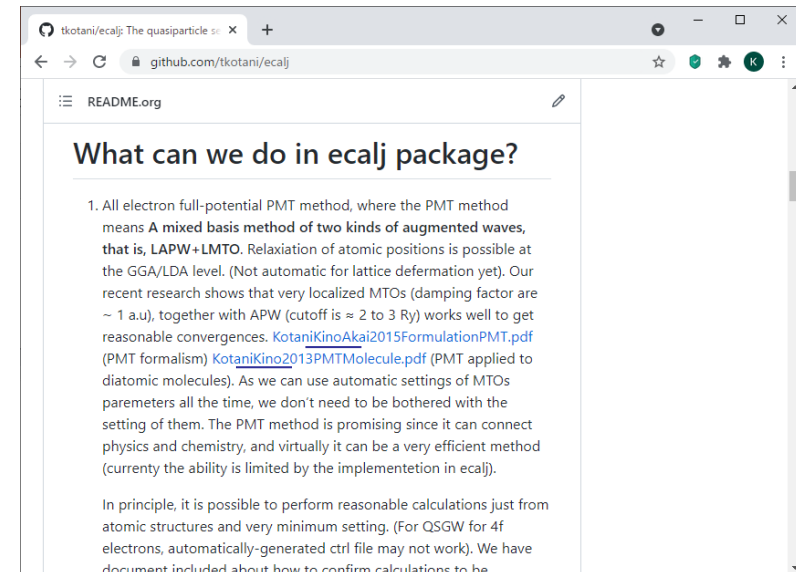
2022年5月13日

自己紹介：第一原理計算

OpenMX



Ecalj (GW)



自己紹介：機械学習



発売日：2021年5月31日発売予定
定価：本体3,100円+税

非プログラマのための機械学習ソフト Orange !

今日「マテリアルズインフォマティクス」が期待され、各分野でその取り組みが急速に進んでいる。しかし機械学習を用いたデータマイニングである性質上、まずはプログラミング技術を習得しなければいけない実情がある。

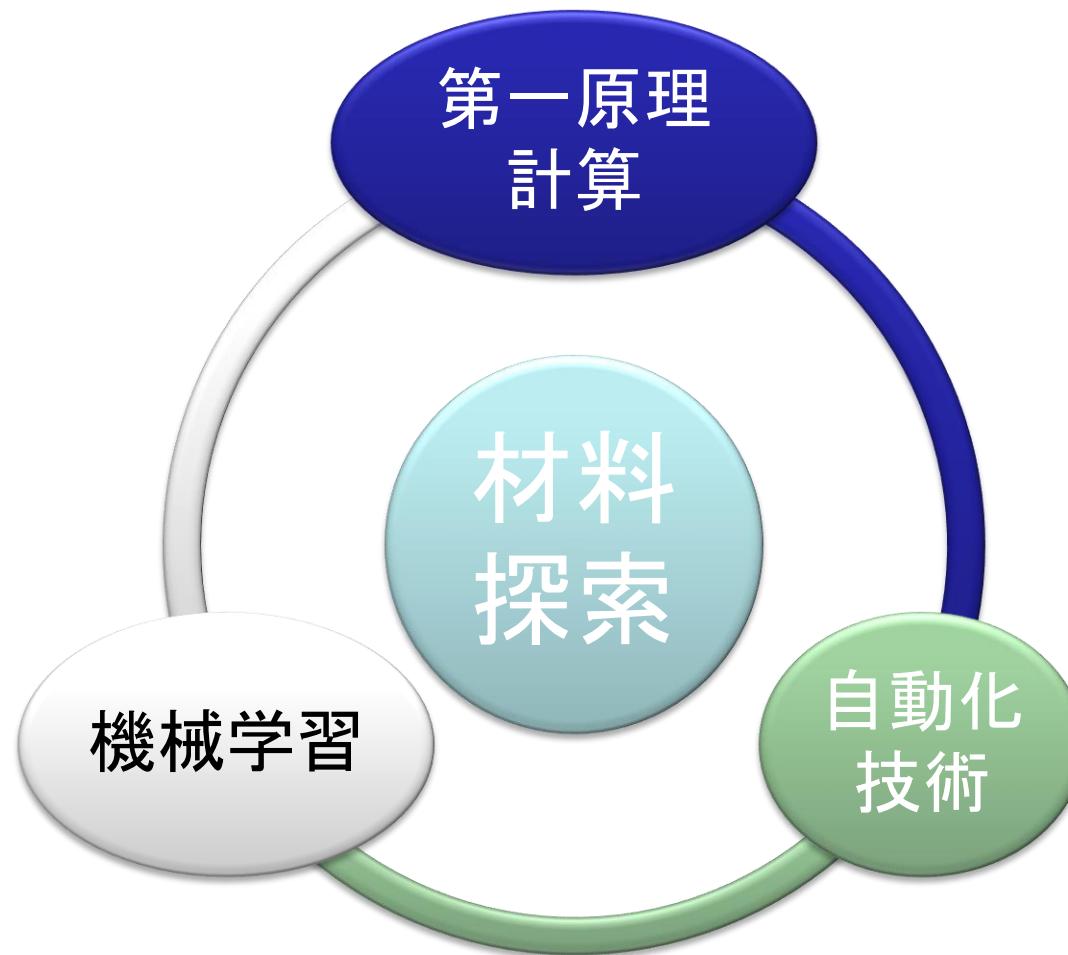
ところが、GUIベースのフリーソフト「Orange Data Mining」を使用すると、プログラミングを学んでいない人でも機械学習を実践することができる。本書はその手法を紹介する。

著者によるサンプルスクリプトとデータファイルも準備しているため、手を動かし理解しながら学べる。また各章に練習問題を配し身につく構成となっている。これから始める方に最適な一冊。

著者	木野日織、ダム ヒョウチ
ページ数	200
サイズ	B5変型
ISBN	978-4-7649-0631-0

早稲田大学、企業向け外部セミナーでPython/scikit-learnを用いたマテリアルインフォマティクス入門講座を行う。

自己紹介：まとめ



従来第一原理計算自動化技術と その問題点(1)

自動化技術で既に実用化されているものには、
pymatgenやAFLOW等で第一原理計算プログラム
VASP等を用いた自動化技術があるが、

- VASP等は波動関数法を用いており合金の計算が簡便に行えない。
- 自動化技術を用いたデータベース上で物性値の計算は後回しになっている。

等の問題があり、合金・物性値は未探索領域が多い。

従来第一原理計算自動化技術と その問題点(2)

- 一方、第一原理計算プログラムAkaiKKRは合金物性計算を低コストで行うことができるが、
- 構造入力が独特であり、cif/poscarなど一般的な構造フォーマットから変換することが難しい、
という困難があった。

従来第一原理計算自動化技術と その問題点(3)

第一原理計算プログラムAkaiKKRは波動関数法でなくグリーン関数法であるため、

- 自己無撞着にエネルギー積分下限を決める必要があったが、
- エネルギー積分下限を決めないと自己無撞着に計算できない、

という困難があり、自動化を行うことが難しかった。

AkaiKKR用新技術の特徴

- 等比四元固溶体のエネルギー積分下限を自動的に決めることができた。
- cif/poscarなどから構造入力を生成可能にした。(構造変換テストは念入りに行っている。)
- 合金の物性値計算を安価にできるAkaiKKR用のPythonライブラリを公式に開発した。

実用化に向けた課題

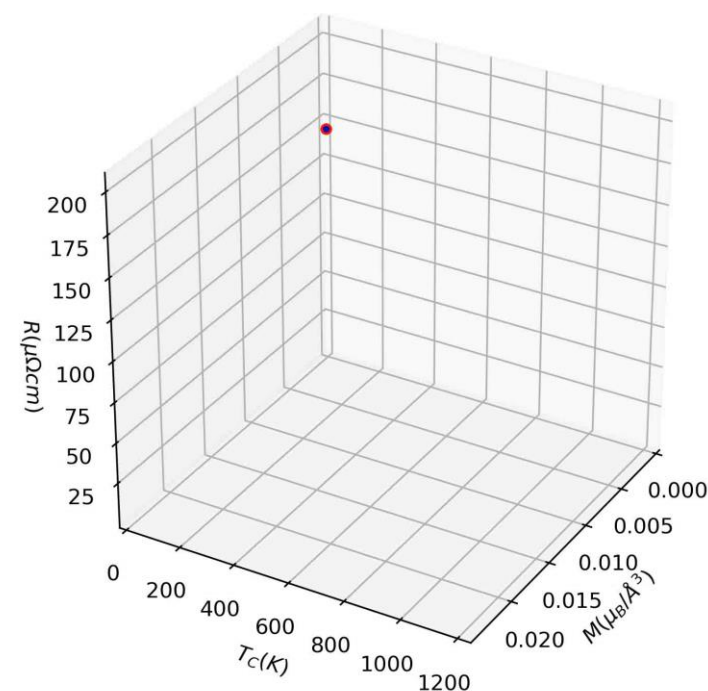
- 現在、等比合金について積分下限を自動設定が可能のところまで開発済み。
- しかし、非等比合金での手法が未解決であり、非等比合金へは改良されたアルゴリズムをテストしている。
- 実用化に向けて、テストを繰り返し行い、自動化技術を確立する必要もあり。

網羅自動計算結果例

面心立方構造と
体心立方構造の
各約7万件の計算
から安定相の
物性値を表示。

動画

H																			He
Li	Be												B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg												Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
Rb	Sr		Zr	Nb	Mo		Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
Fr	Ra																		
			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		



磁化： M

キュリー温度： T_C

電気抵抗： R

網羅計算の問題点

合金の微小なドーピング変化に対して網羅計算を行うと、

- ドーピング変化空間において比較的なめらかな変化をするはずだが、どの程度微小な変化毎に計算を行えば良いのか分からない。

という問題がある。

機械学習(新技術)の特徴

近年、機械学習技術を用いて、

- 能動学習によるより少ない計算量による材料パラメタ空間の探索が可能。

だけでなく、

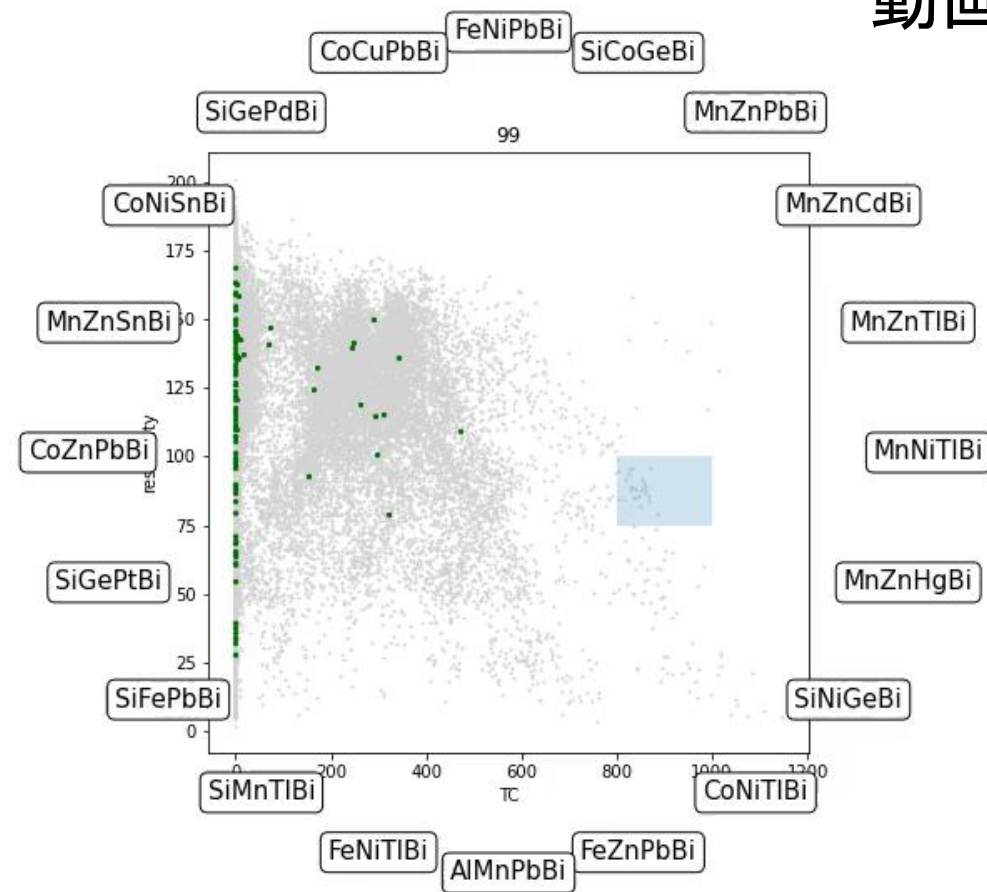
- ベイズ最適化による最適なパラメタの探索
- 計算データに対して回帰モデルの内部分析(ホワイトボックス化)による意味が分かる“法則”取得

などを行うことが出来る。

機械学習：多目的ベイズ最適化例

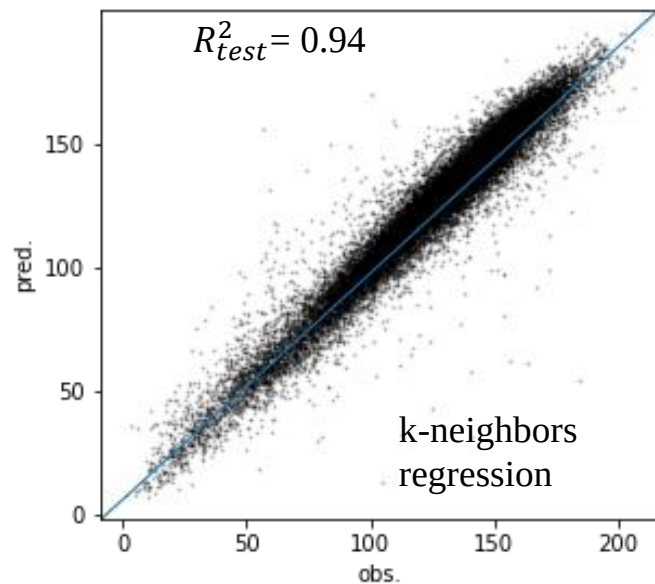
動画

図のTC(磁気相転移温度)と残留電気抵抗率(resistivity)に対して青色部分を目的領域とする。

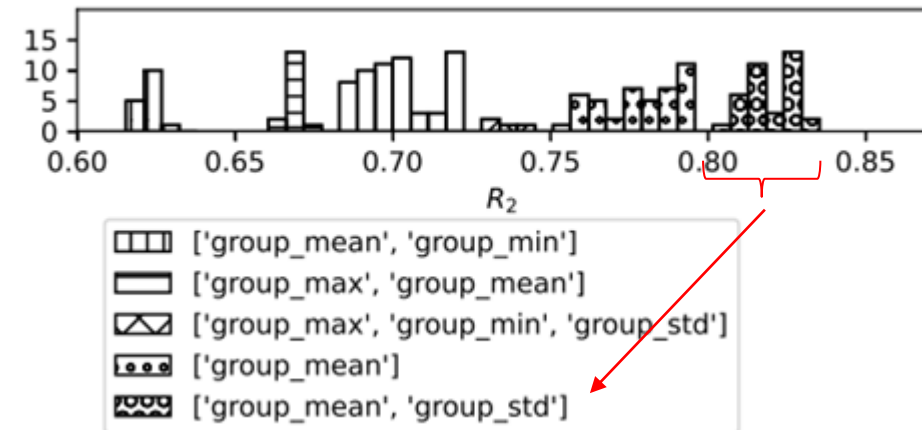


機械学習：“法則”の発見(1)

残留抵抗率の 回帰モデル



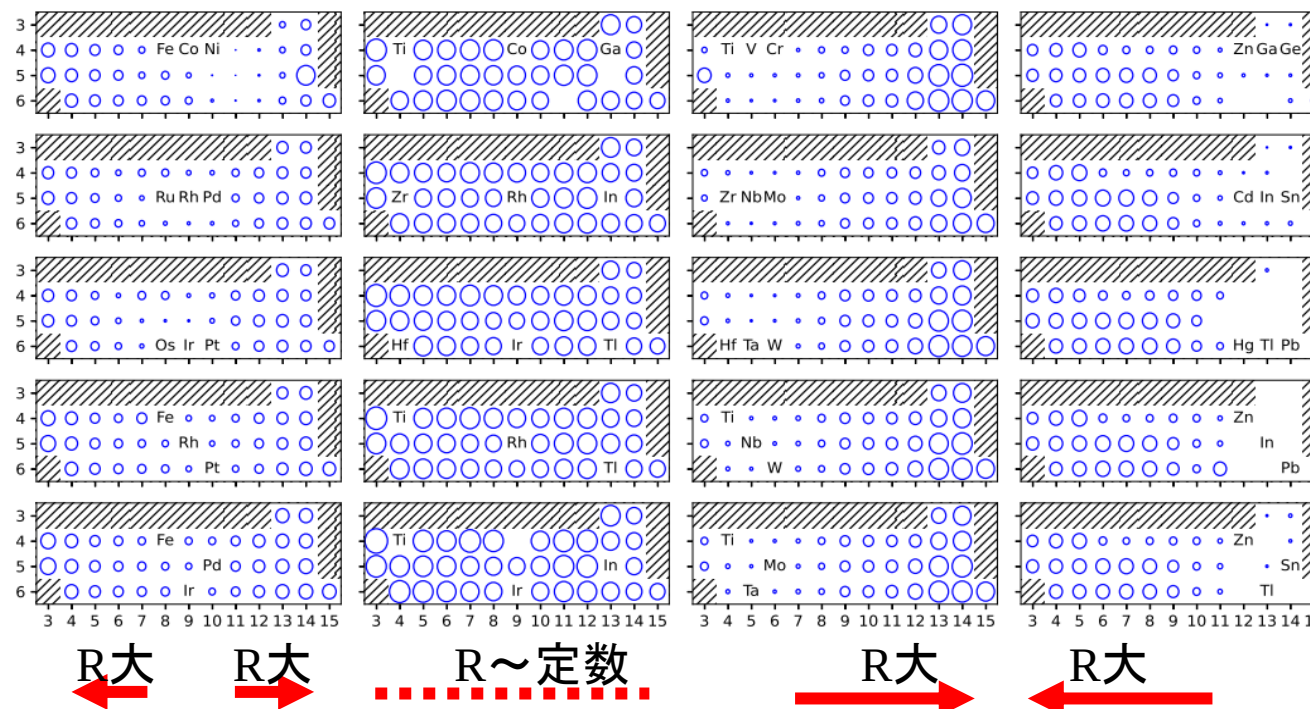
回帰モデルの ホワイトボックス化



周期律表グループの重要性が
大きいという結果が得られる。

機械学習：“法則”の発見(2)

四元系等非固溶体(XYZW)の周期律表上での“法則”の図示



同様の“法則”はCu,Al配線材料にドーブした場合にも知られている。
前義治「比較しながら材料を理解する 銅とアルミニウムのおはなし」第7章

既存計算機プログラム自動化技術と その問題点

従来技術は

- バッチジョブを実行できる環境とローカルファイルサーバーが同じディスク空間を参照せねばならない。
- 富岳などローカルファイルサーバーと別の外部計算機を用いる場合を想定していない。

という問題点があった。

次世代計算機プログラム自動化技術

近年、AiiDAと呼ばれるPythonワークフロー環境による自動化が欧州を中心に進んでいる。これは、

- 計算結果だけでなく計算順序を含め保存可能。
- 富岳などの計算サーバー上の計算結果を自動的にローカルファイルサーバー上に移動可能な仕組みを持つ。

という利点を持つ。

AiiDAワークロー環境の問題点

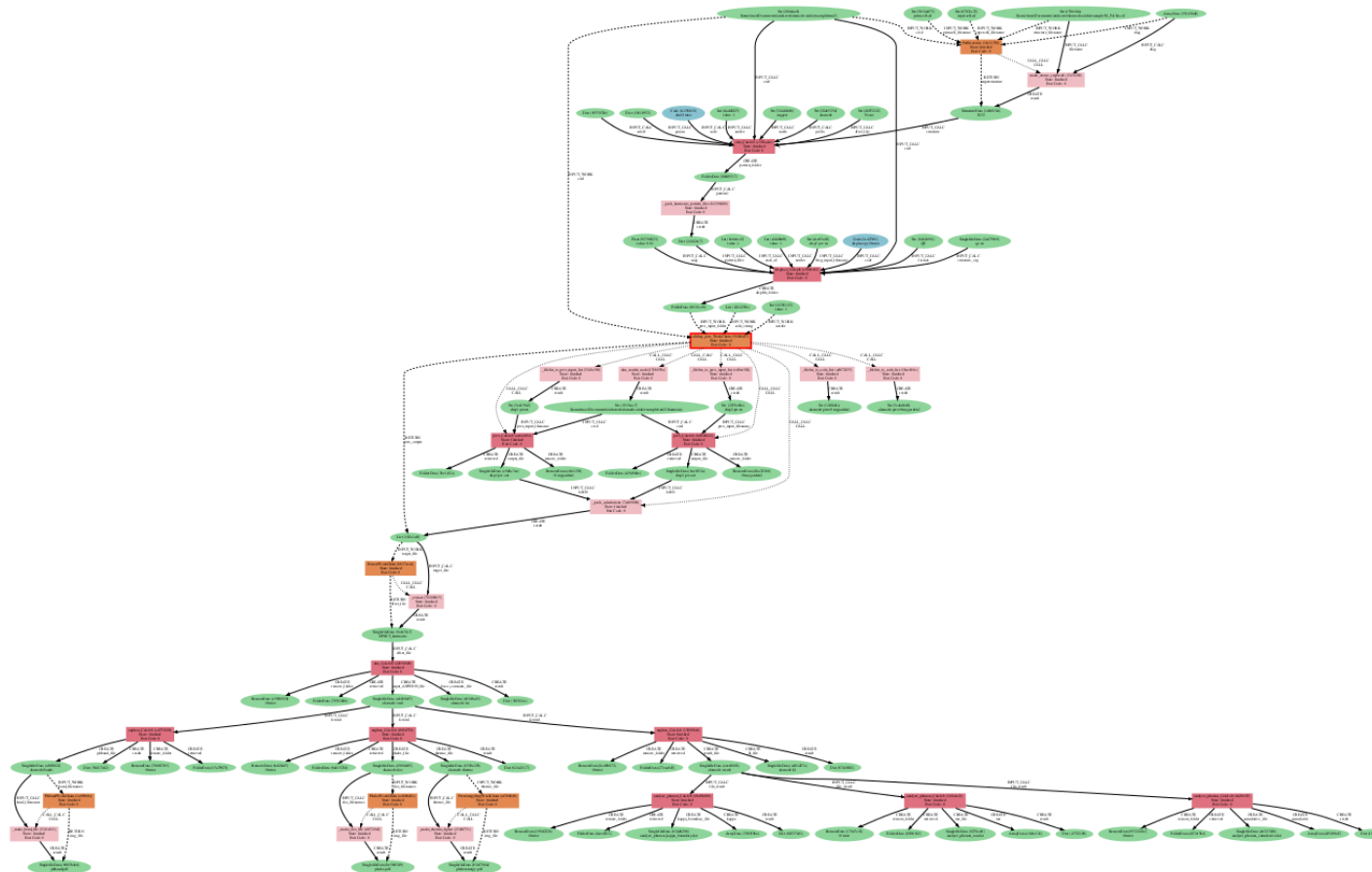
様々な第一原理プログラムにもPythonプラグインにより対応できるが、

- 考え方が従来技術と大きく異なるのでプラグイン作成・利用ハードルが高い。

という欠点も持つ。

これに対しても技術協力が可能。

網羅計算のための AiiDAを用いた自動化実装例



https://github.com/nim-hrkn/alamode_aiida

AiiDAワークフローを用いた自動化計算 実用化に向けた課題

- 現在はAkaiKKRにてAiiDAワークフローを作成していない。
- AkaiKKR用のAiiDAワークフロー開発を行うことで、外部(複数)計算サーバーでの計算結果をローカルファイルサーバーに容易にデータ集約することが可能になる。

第一原理計算の想定される用途

- AkaiKKRの特徴を活かすには
 - VASPでは高コスト計算になる合金を対象とするのが利点大きい。
 - 磁性を含む物質の物性値を計算するのが利点大きい。
 - 構造最適化は不得意なので別プログラムを併用することが望ましい。
 - 決められた構造に対して物性値の計算を行うのが適している。

と考える。

機械学習を用いた第一原理計算の 想定される用途

- ドープ量変化に対しては第一原理計算と能動学習を組みわせることでより少ない計算量で多くの材料領域を探索することが期待できる。
- 元素置換に対しては網羅計算を行う方が重要な変化を見逃さずに探索することが期待できる。

両者を組み合わせて元素置換、ドープ量変化の材料探索を行うことが最良と考えられる。

機械学習によるデータ解析の 想定される用途

- ベイズ最適化による少ない評価回数での材料候補選定が可能と期待される。
- 第一原理計算によって得られたデータを用いて妥当な回帰・分類モデルが得られれば、そのホワイトボックス化による“法則”の取得が可能と期待できる。

企業への期待

本発表は特許技術ではなく著作物として保護されているライブラリーでの発表である。

- ライブラリはPythonで書かれているが、別計算機言語でのソフトを開発する企業の需要には技術指導・協力を希望。

もしくは

- 第一原理計算とその自動化技術、更に機械学習と組み合わせでより少ない計算で広範囲な物性の計算による材料探索を行いたい企業との共同研究を希望。

技術に関する知的財産権

本発表は特許技術ではなく著作物として保護されているライブラリーでの発表である。

- 網羅計算ライブラリ(一部)

<https://github.com/AkaiKKRteam/AkaiKKRPythonUtil>

- 機械学習ライブラリ

- AiIDAのALAMODEへの実装例

https://github.com/nim-hrkn/alamode_aiida

お問い合わせ先

国立研究開発法人 物質・材料研究機構
外部連携部門企業連携室
特別専門職 郡司 裕一(ぐんじ ゆういち)

TEL 029-859-2600 内線6095

e-mail GUNJI.Yuichi@nims.go.jp